Moderne Theoretische Physik I
Grundlagen der Quantenmechanik

Blatt 0

Prof. A. Metelmann
S. Böhling, L. Orr, V. Stangier
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Besprechung am: 26.04.2023

Dieses Übungsblatt wird im Tutorium besprochen, aber wird nicht bepunktet.

Aufgabe 1. Dirac Delta Distribution

Wir betrachten die Funktionenschar $\delta_\sigma(x) = \alpha e^{-x^2/\sigma^2}$ und wollen zeigen, dass diese im Limes $\sigma \to 0$ der Diracschen Distribution $\delta(x)$ entspricht. Letztere ist keine Funktion im eigentlichen Sinne sondern eine Wahrscheinlichkeitsverteilung. Diese ist so definiert, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte null ist, wenn $x \neq 0$. Sie ist aber dennoch normalisiert, sodass das Integral über die reelle Achse 1 ergibt. Dies bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung in $x = 0$ nicht null ist.

1. Bestimmen Sie α damit jede Funktion $\delta_\sigma(x)$ normiert ist gemäß
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_\sigma(x) = 1\,. \tag{1}$$
2. Zeigen Sie, dass für jedes feste x der Grenzwert $\lim\limits_{\sigma\to 0} \delta_\sigma(x) = \delta(x)$ erfüllt ist.
3. Leiten Sie mithilfe des Grenzverhaltens (f ist eine glatte Funktion)
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_\sigma(x) f(x) \to \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta(x) f(x) = f(0) \tag{2}$$
ein entsprechendes Verhalten für $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta'_\sigma(x) f(x)$ her.
4. Beweisen Sie die Beziehung
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta\left[f(x)\right] = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \tag{3}$$
wobei x_i die einfachen Nullstellen der Funktion $f(x)$ sind.

Lösung Aufgabe 1

1. Das Integral über die Gaußverteilung liefert
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \alpha e^{-x^2/\sigma^2} = \alpha\sigma\sqrt{\pi}\,,$$
was auf 1 normiert ist, wenn $\alpha^{-1} = \sigma\sqrt{\pi}$.

2. Zuerst stellen wir fest, dass die Normierungsbedingung durch die Wahl von $\alpha^{-1} = \sigma\sqrt{\pi}$ erfüllt ist. Dann ist eine Fallunterscheidung notwendig: Für $x = 0$ gilt $\delta_\sigma(0) = \alpha = 1/(\sqrt{\pi}\sigma) \to \infty$. Andernfalls ist der Limes immer durch das exponentielle Verhalten dominiert und wir finden $\delta_\sigma(x) = (1/\sqrt{\pi}\sigma)e^{-x^2/\sigma^2} \to 0$. Dies kann man gut zeigen durch:
$$e^x = \sum_n \frac{x^n}{n!} = 1 + x + ... \geq 1 + x \Leftrightarrow e^{-x} \leq \frac{1}{1+x}$$
$$\Rightarrow 0 \leq \lim_{\sigma\to 0} \frac{e^{-x^2/\sigma^2}}{\sigma} \leq \lim_{\sigma \to 0} \frac{\sigma}{\sigma^2 + x^2} = 0\,,$$
falls $x \neq 0$. Damit beschreibt die Funktionenschar $\delta_\sigma(x)$ im Grenzfall $\sigma \to 0$ die Dirac Delta Distribution.

3. Mittels partieller Integration findet man sofort
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta'_\sigma(x) f(x) = [\delta_\sigma(x) f(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_\sigma(x) f'(x) \to -f'(0)\,.$$
Eine etwas weniger elegante aber dennoch instruktive Herleitung basiert auf der Beobachtung, dass $\delta'_\sigma(x) = (-2x/\sigma^2)\delta_\sigma(x)$. Da $\delta_\sigma(x)$ besonders die Werte um $x = 0$ hervorhebt, lässt sich $f(x)$ als Taylorreihe schreiben. Dadurch gilt
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta'_\sigma(x) f(x) \approx \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, (-2x/\sigma^2)\delta_\sigma(x)\, [f(0) + f'(0)x]\,.$$
Der erste Term in der eckigen Klammer liefert einen ungeraden Integranden (das Integral verschwindet somit). Der zweite Term ist gerade und liefert
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta'_\sigma(x) f(x) \approx \frac{\partial}{\partial\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{-f'(0)}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\sigma^2} = \frac{\partial}{\partial\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{-f'(0)}{\sigma} \alpha e^{-x^2/\sigma^2} = -f'(0)\,.$$
wobei $f^{(n)}$ die $n$te Ableitung der Funktion darstellt.

4. Da die δ Distribution laut unserer Definition null ist, wenn ihr Argument nicht null ist, können wir uns auf eine Region der Länge $2\epsilon > 0$ um die jeweilige Nullstelle herum besschränken. In dieser Region ist die Funktion gut durch ihre lineare Taylor-Entwicklung beschrieben, i. e. $f(x) = (x - x_i) f'(x_i)$, also
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta\,[f(x)] = \sum_i \int_{x_i-\epsilon}^{x_i+\epsilon} \mathrm{d}x\, \delta\,[f(x)] = \sum_i \int_{x_i-\epsilon}^{x_i+\epsilon} \mathrm{d}x\, \delta\,[(x - x_i) f'(x_i)]$$
Als nächstes verwenden wir die Substitution $y = (x - x_i) f'(x_i)$ und erhalten
$$\sum_i \int_{x_i-\epsilon}^{x_i+\epsilon} \mathrm{d}x\, \delta\,[(x - x_i) f'(x_i)] = \sum_i \int_{-f'(x_i)\epsilon}^{f'(x_i)\epsilon} \frac{\mathrm{d}y}{f'(x_i)} \delta(y) = \sum_i \frac{\operatorname{sign}[f'(x_i)]}{f'(x_i)} = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|}\,,$$
wobei wir verwendet haben, dass je nach Vorzeichen von $f'(x_i)$ das Intervall richtig oder falsch herum durchlaufen wird.

Aufgabe 2. Gauß Integral

Wir betrachten nun eine etwas andere Gauß Verteilung als in Aufgabe 1, nämlich $\delta_\sigma(x) = \alpha e^{-(x-c)^2/\sigma^2}$ mit $\sigma \neq 0$.

1. Zeigen Sie, dass die Normalisierungskonstante α mit dem Ergebnis in Aufgabe 1.1 übereinstimmt.

2. Berechnen Sie den Erwartungswert der Variable x indem Sie folgendes Integral berechnen
$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_\sigma(x)\, x. \tag{4}$$
Dies ist das erste Moment der Verteilung, auch Mittelwert genannt.

3. Berechnen Sie den Mittelwert der Variable x^2 indem Sie folgendes Integral berechnen

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_\sigma(x)\, x^2. \tag{5}$$

Mit diesen beiden Größen können wir das zweite Moment der Verteilung berechnen $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$. Diese Größe wird auch Standardabweichung genannt (Korrektur: hier stand vorher "Varianz", das war ein Fehler).

Lösung Aufgabe 2

1.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_\sigma(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \alpha e^{-(x-c)^2/\sigma^2} \quad \text{change variables, } y = x - c \text{ and } \mathrm{d}y = \mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, \alpha e^{-y^2/\sigma^2} \quad \text{therefore } \alpha = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}}\end{aligned}$$

This integral is identical to the one from 1.1, therefore α is the same.

2.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_\sigma(x)\, x &= \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-(x-c)^2/\sigma^2}\, x \quad \text{change variables, } y = x - c \text{ and } \mathrm{d}y = \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2} (y + c) \quad \text{split up the integral} \\ &= \left(\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2}\, c \right) + \left(\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2}\, y \right)\end{aligned}$$

We can evaluate these integrals separately. We begin with the first integral,

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-y^2/\sigma^2}\, c = c$$

Since c is a constant, this integral is just 1 times c. Now the second integral:

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2}\, y \quad \text{split the integral about } y = 0 \\ &= \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \left[\int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2}\, y + \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2}\, y \right] \quad \text{change of variables in the first integral, } y' = -y \\ &= \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \left[- \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}y'\, e^{-y'^2/\sigma^2}\, y' + \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2}\, y \right] \quad \text{these two integrals cancel} \\ &= 0\end{aligned}$$

Combining the two results we have

$$\langle x \rangle = c.$$

3. As in the previous solution, we first perform a change of variables, $y = x - c$, and expand the integral.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta_\sigma(x)\, x^2 &= \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2}\, (y + c)^2 \\ &= \left(\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2} c^2 \right) + \left(\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2} 2cy \right) + \left(\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2} y^2 \right)\end{aligned}$$

The first and second integrals are easily evaluated using the same logic as in 2.2. We have:

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2} c^2 = c^2 \left(\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2} \right) = c^2$$

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2} 2cy = 2c \left(\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2} y \right) = 0$$

The third integral is solved as follows:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-y^2/\sigma^2} y^2 &= \sqrt{\frac{a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-ay^2} y^2 \quad \text{replace } a = 1/\sigma^2 \\
&= \sqrt{\frac{a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, \frac{\partial}{\partial a}\left(-e^{-ay^2}\right) \quad \text{rewrite integrand as a derivative} \\
&= -\sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\partial}{\partial a}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-ay^2} \quad \text{commute derivative with integral} \\
&= -\sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\partial}{\partial a}\left(\sqrt{\frac{\pi}{a}}\right) \quad \text{integrate Gaussian as usual, take derivative and replace } a \text{ to finish} \\
&= \frac{\sigma^2}{2}
\end{aligned}$$

Combining all of these integrals we have:

$$\langle x^2 \rangle = c^2 + \frac{\sigma^2}{2}.$$

The standard deviation (Korrektur: hier stand vorher "variance", das war ein Fehler) is simply:

$$\Delta x = \sqrt{\left(c^2 + \frac{\sigma^2}{2}\right) - c^2} = \frac{\sigma^2}{2}.$$